

**КИНЕТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ПЕРЕНОСА ЭЛЕКТРОНОВ В GAAS
В УСЛОВИЯХ СИЛЬНЫХ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ**

Е. С. Сойко

Непрерывный прогресс в микроэлектронике в настоящее время невозможен без широкого применения компьютерного моделирования процессов, протекающих в полупроводниковых структурах. Одним из наиболее перспективных подходов к такому моделированию является подход с применением кинетического метода Монте-Карло.

В настоящей работе решалась задача моделирования переноса электронов в GaAs методом Монте-Карло в диапазоне электрических полей $\mathcal{E} = 10^6 - 10^7$ В/м при температуре $T = 300$ К и концентрации донорной примеси $N_d = 10^{16}$ см⁻³. При моделировании учитывались все типы энергетических долин в зоне проводимости GaAs, Γ , L и X, а также следующие доминирующие механизмы рассеяния в GaAs, такие как рассеяние на полярных оптических фононах, рассеяние на акустических фононах, рассеяние на ионизированных примесях, междолинное рассеяние между эквивалентными и неэквивалентными долинами.

Разработанная модель переноса и реализующая ее программа позволяют рассчитать ряд электрофизических свойств GaAs и кинетических параметров, характеризующих перенос электронов в этом материале.

Упрощенная блок-схема метода Монте-Карло приведена на рис. 1. Решение задачи начинается с задания входных параметров: температуры кристаллической решетки T , концентрации доноров N_d , напряженности электрического поля $\vec{\mathcal{E}}$. Для простоты считается, что вектор напряженности $\vec{\mathcal{E}}$ направлен вдоль одной из осей координат, например z . Так же необходимо выбрать модель закона дисперсии $E(\vec{k})$. На начальном этапе конкретизируется набор механизмов рассеяния и производится расчет интенсивностей рассеяния каждого из механизмов $W(E)$, а начальная величина импульса электрона $\vec{p}$ выбирается в соответствии с равновесной максвелловской функцией распределения.

Время свободного пробега вычисляется следующим образом:

$$t_S = -\frac{1}{\Gamma} \ln z,$$

где Γ – максимальная суммарная интенсивность рассеяния, z – равномерно распределенное случайное число в интервале 0–1 [1; 2].

Известно, что для получения максимального быстродействия выгоднее всего хранить рассчитанные заранее таблицы сумм нормированных интенсивностей рассеяния $\tilde{W}_j(E_l) = \Gamma^{-1} \sum_{k=1}^j W_k(E_l)$ для дискретного набора энергий E_l и пользоваться им при розыгрыше номера механизма рассеяния j [1; 2]. Для определения механизма рассеяния последовательным перебором разыгрывается номер j , для которого выполняется условие $\tilde{W}_{j-1}(E) < z < \tilde{W}_j(E)$, $j = 1, 2, \dots, m$. В случае невыполнения этого неравенства считается, что произошел так называемый процесс «саморассеяния» и состояние электрона не меняется.

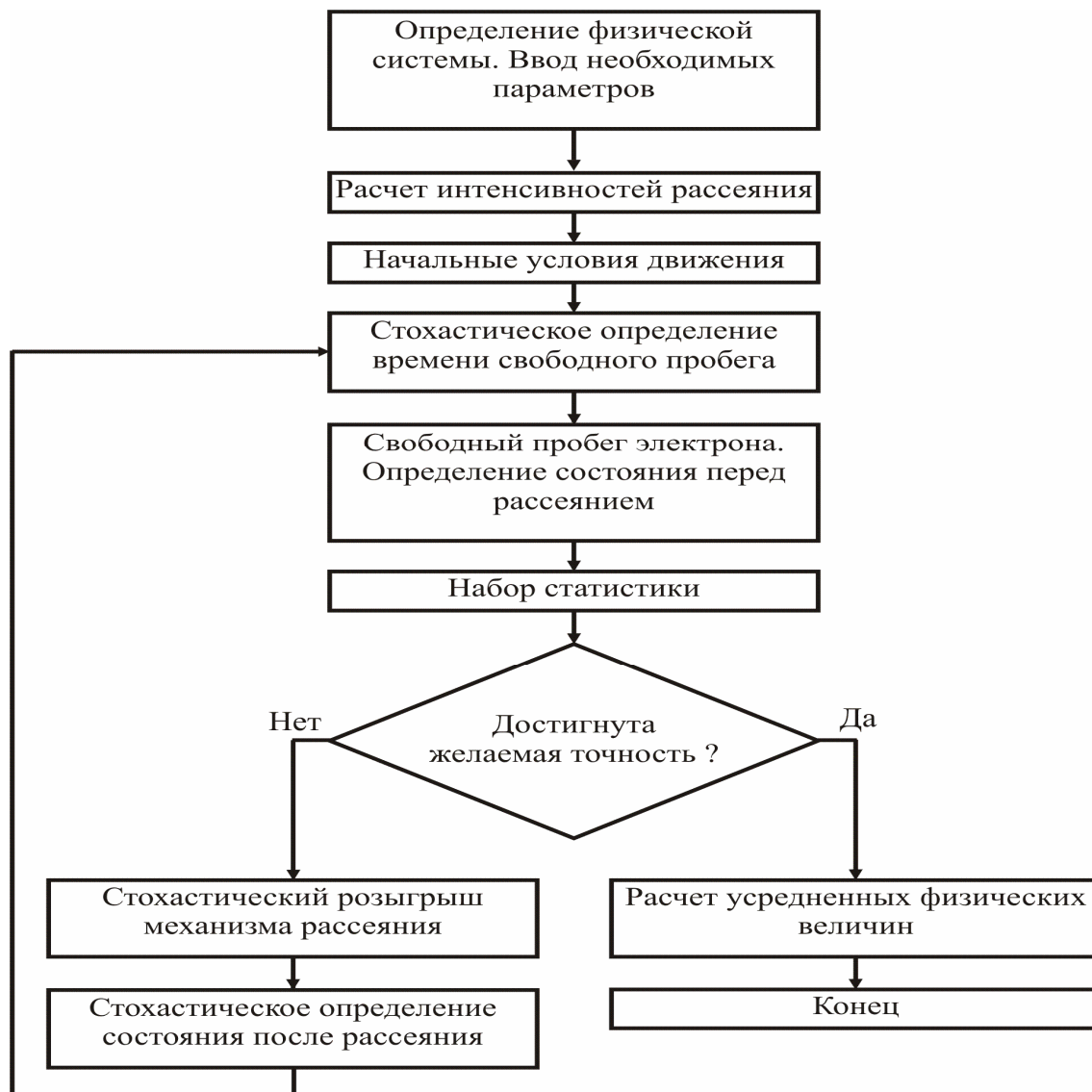


Рис. 1. Блок-схема одночастичного алгоритма моделирования кинетических задач методом Монте-Карло, состояние электрона фиксируется перед каждым рассеянием

При моделировании свободного пробега электрона в поле с напряженностью $\vec{\varepsilon}$ учитывался непараболический закон дисперсии [1; 2]. В качестве примера на рис. 2 приведена рассчитанная зависимость средней дрейфовой скорости от напряженности электрического поля в диапазоне электрических полей $\varepsilon = 10^6 \div 10^7$ В/м. Как видно из рис. 2, результаты расчетов находятся в хорошем соответствии с известными экспериментальными данными, что подтверждает адекватность разработанной модели реальным процессам переноса. Это можно объяснить «вторым эффектом Ганна», когда происходит переход более легких L-электронов в тяжелую X-долину.

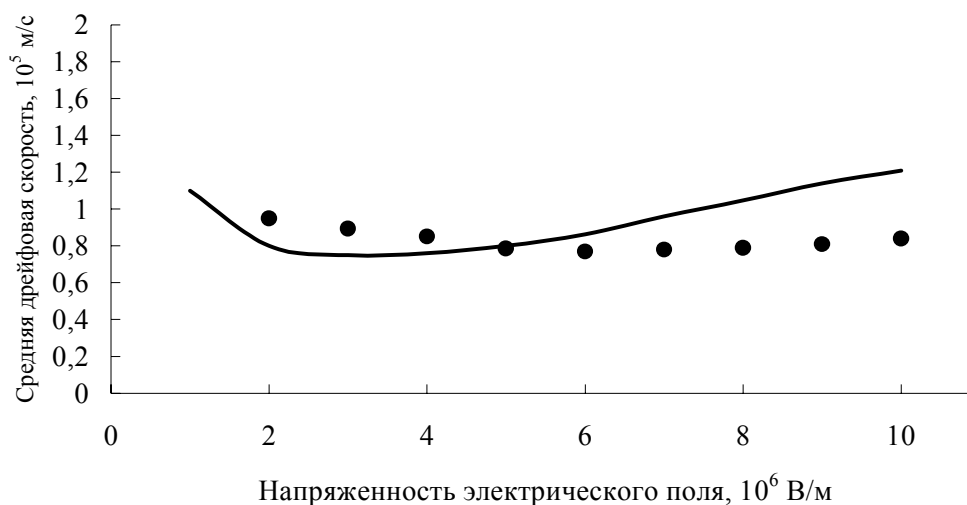


Рис. 2. Зависимость средней дрейфовой скорости в Γ -, L и X-долинах от напряженности электрического поля:
 ———— средняя дрейфовая скорость; • — эксперимент [3]

Литература

1. Иващенко В. М., Митин В. В. Моделирование кинетических явлений в полупроводниках. Метод Монте-Карло / Отв. ред. З. С. Грибников; АН УССР. Институт полупроводников. Киев: Наук. думка, 1990, 192 с.
2. Шур М. Современные приборы на основе арсенида галлия: Пер. с англ. М.: Мир, 1991. 632 с.
3. Massimo V. Fischetti. Monte Carlo Simulation of Transport in Technologically Significant Semiconductors of the Diamond and Zinc-Blende Structures— Part I: Homogeneous Transport // IEEE Transactions on Electron Devices. Vol. 38. № 3. March. 1991. P. 634–649.